

# 用 K-K 关系求 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的长波折射率

褚君浩

(中国科学院上海技术物理研究所)

**摘要**——根据  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的本征吸收光谱, 利用 K-K 关系式, 计算了  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  不同组份样品的长波折射率  $n_0$ , 发现该材料符合 Moss 关系式  $n_0^4 E_g = 55.5x + 7.8$ 。把  $E_g(x, T)$  的经验公式代入, 得到  $n_0$  的经验公式, 可以计算不同组份样品在不同温度下的  $n_0$  值, 结果与实验基本相符。

## 一、Kramers-Kronig 关系式

根据著名的 Kramers-Kronig 关系式<sup>[1]</sup>, 有

$$n_a - 1 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\alpha(\lambda)}{1 - (\lambda/\lambda_a)^2} d\lambda \quad (1)$$

其中  $\alpha(\lambda)$  为吸收系数,  $\lambda$  为波长,  $n_a$  为波长  $\lambda_a$  处的折射率。如果实验测得吸收光谱  $\alpha(\lambda)$ , 就可以逐点计算  $n_a$ 。特别是当  $\lambda_a \rightarrow \infty$  时, 有

$$n_0 - 1 = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \alpha(\lambda) d\lambda \quad (2)$$

$n_0$  为折射率的长波极限值, 是本征吸收边长波限以外  $\lambda \gg \lambda_{co}$  处色散很小的波长区域内材料的光学折射率。

对于许多光导性化合物, 包括许多卤化物、硫化物、氧化物以及一些 III-V 族化合物、IV-VI 族化合物和 II-VI 族化合物, 曾利用它们的本征吸收光谱, 从式(2)计算得到长波折射率  $n_0$ <sup>[2]</sup>。但对  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料, 由于没有比较完善的吸收光谱, 尚未见到关于长波折射率  $n_0$  的报道。在文献[3]的  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  红外光吸收实验中, 由于样品处理得很薄, 测得高达  $5000 \text{ cm}^{-1}$  的吸收系数, 吸收光谱出现了明显的转折。于是, 在以吸收系数  $\alpha$  为纵轴, 波长  $\lambda$  为横轴的坐标系中, 就可以利用 K-K 关系式来粗略地计算  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的长波折射率。这对于研究  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的远红外光学性质, 具有一定参考意义。

## 二、 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 的长波折射率

为了计算长波折射率, 必须计算式(2)中的积分项。根据我们对  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  样品所测

得的吸收光谱<sup>[3]</sup>, 可以对式(2)进行数值求解, 即计算吸收曲线  $\alpha(\lambda)$  与纵轴  $\alpha$ 、横轴  $\lambda$  所围成的面积, 就是积分  $\int_0^{\infty} \alpha(\lambda) d\lambda$ 。由于自由载流子吸收系数大约在  $10^{-3} - 10^2 \text{ cm}^{-1}$  之间, 波长在  $100 \mu\text{m}$  之内, 对积分面积的贡献小于 0.5, 与本征吸收的贡献相比可以忽略, 因此只须考虑本征吸收对长波折射率的贡献。我们把  $\alpha - \nu$  的本征吸收光谱画成  $\alpha - \lambda$  的曲线, 再把吸

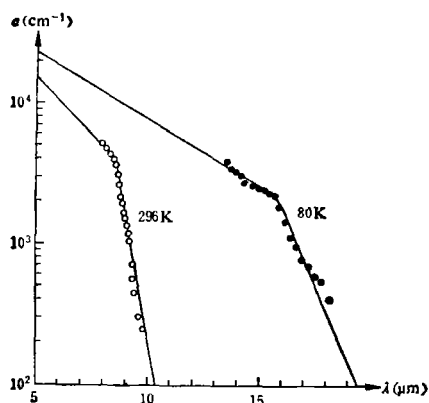


图 1  $\text{Hg}_{0.81}\text{Cd}_{0.19}\text{Te}$  的吸收光谱

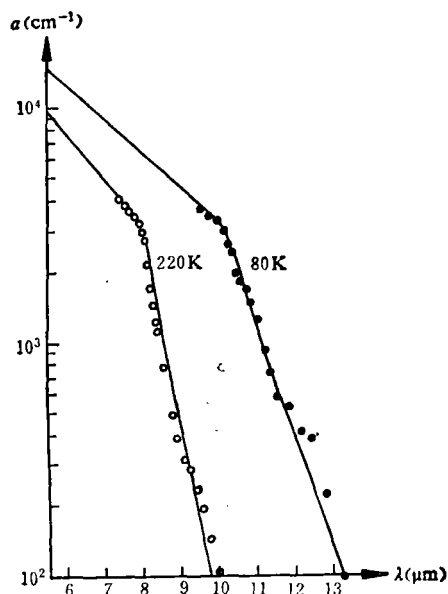


图 2  $\text{Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$  的吸收光谱

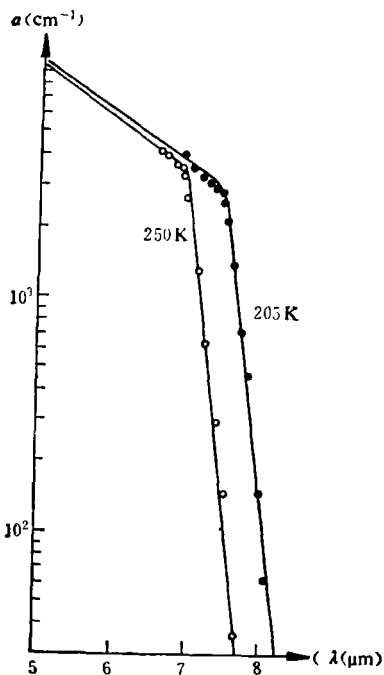


图 3  $\text{Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te}$  的吸收光谱

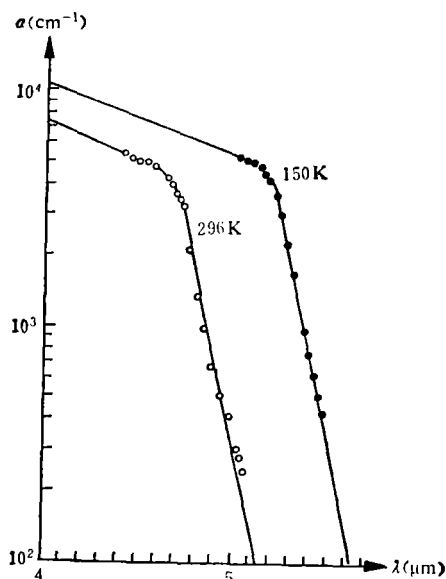


图 4  $\text{Hg}_{0.72}\text{Cd}_{0.28}\text{Te}$  的吸收光谱

收边延长到与横轴  $\lambda(\alpha=1\text{ cm}^{-1})$  相交, 把曲线转折点上方的曲线延长到与纵轴  $\alpha(\lambda=0)$  相交。图 1 至图 6 分别表示六个组份样品的吸收光谱。对所有样品, 300 K 时吸收曲线与纵轴 ( $\lambda=0$ ) 的交点位置大约在  $10^5-2 \times 10^5\text{ cm}^{-1}$  之间。

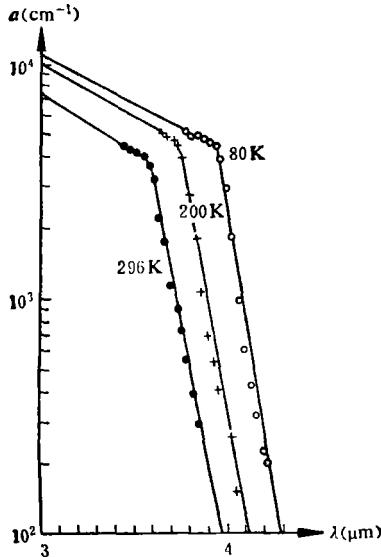


图 5  $\text{Hg}_{0.66}\text{Cd}_{0.34}\text{Te}$  的吸收光谱

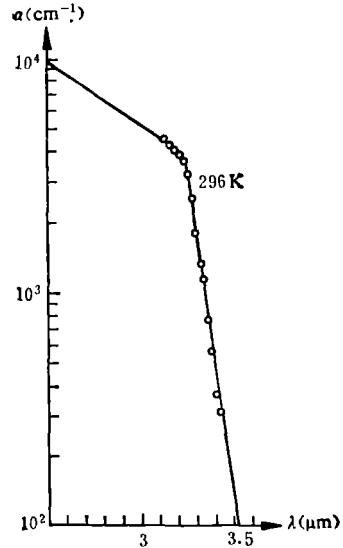


图 6  $\text{Hg}_{0.63}\text{Cd}_{0.37}\text{Te}$  的吸收光谱

根据图 1 至 6, 利用式(2)计算所得到的积分值

$S = \int_0^{\infty} \alpha(\lambda) d\lambda$ , 以及  $n_0$  值分别列在表 1 中。由于吸收曲线实验点所引进的误差约为  $\Delta S = \pm 0.5$ , 计算  $n_0$  的误差  $\Delta n_0$  在  $\pm 0.03$  之内。

表 1 中还列出了不同组份样品在不同温度下的  $E_g$  值, 及  $n_0^4 E_g$  值。可以看出,  $n_0$  值随着禁带宽度  $E_g$  的变大而缓慢降低, 每一组份样品,

$$n_0^4 E_g = c_0 \quad (3)$$

$c$  是常数。Moss<sup>[2]</sup> 曾根据电介质中能级按介电常数的平方而下降的概念, 认为  $n_0^4 E_g$  应为常数, 并发现大多数化合物半导体在无吸收的波长区域, 折射率的四次方  $n_0^4$  与禁带宽度  $E_g$  的乘积确实都在 49(InAs) 到 210(PbTe) 的范围内。从这结果看来,  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料的  $n_0^4 E_g$  还与  $x$  有关, 即仍然与  $E_g$  有关。图 7 表示  $n_0^4 E_g$  与  $x$  有简单的直线关系, 可以写为:

$$n_0^4 E_g = 55.5x + 7.8. \quad (4)$$

根据  $E_g(x, T)$  的经验公式<sup>[3]</sup>,

$$E_g(x, T) (\text{eV}) = (-0.295 + 1.87x - 0.28x^2) + (6.0 - 14x + 3.0x^2) \cdot 10^{-4}T + 0.35x^4, \quad (5)$$

式中  $x^4$  项是为了与 CdTe 禁带宽度值符合而加上的。于是,

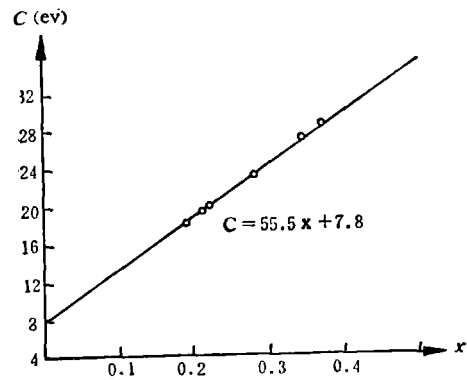


图 7  $c$  与  $x$  的关系

$$n_0^4 = \frac{55.5x + 7.8}{(-0.295 + 1.87x - 0.28x^2) + (6.0 - 14x + 3.0x^2) \cdot 10^{-4}T + 0.35x^4}, \quad (6)$$

该式可以用来粗略计算不同组份不同温度下  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  材料的长波折射率。

表1  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  的  $n_0$  值

$x$	$T(K)$	$S$	$n_0$	$E_g(\text{eV})$	$n_0^2 E_g(\text{eV})$	$c$
0.19	80	56.9	3.88	0.079	17.90	18.0
	296	45.7	3.32	0.149	18.15	
0.21	80	51.2	3.59	0.118	19.69	19.4
	220	46.0	3.33	0.155	19.05	
0.22	205	45.6	3.31	0.167	20.11	20.1
	250	44.4	3.25	0.179	20.05	
0.28	150	42.7	3.16	0.238	23.73	23.4
	296	40.3	3.04	0.270	23.06	
0.34	80	40.1	3.03	0.319	26.89	27.3
	200	39.5	3.00	0.336	27.21	
	296	39.1	2.98	0.351	27.68	
0.37	296	38.1	2.93	0.388	28.59	28.6

### 三、实验结果

Finkman 和 Nemirovsky<sup>[4]</sup> 曾对  $x=0.205$  样品进行透射测量, 根据低吸收部分的干

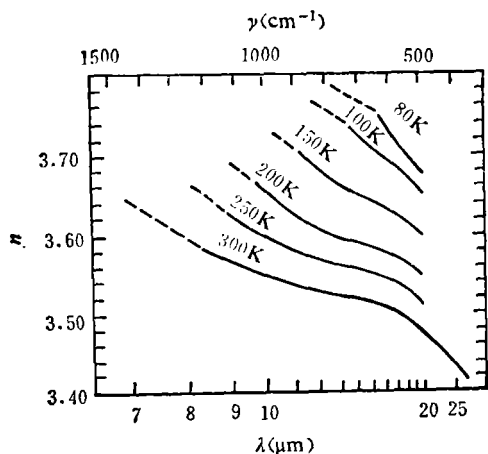


图8  $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$  的折射率  
(取自参考文献<sup>[4]</sup>)

涉条纹间隔, 计算了不同温度下不同波长处的折射率。其结果见图8。在  $\lambda=20\mu\text{m}$  处不同温度下的折射率以及根据式(6)计算得到的相应的长波折射率列在表2中。从表中可看出: 在低温端, 计算值与实验值符合得很好。随着温度升高, 计算值低于实验值, 而且差别愈来愈大。这可能是由于载流子浓度随着温度升高而增大, 而载流子的吸收在计算中被忽略所致。

样品提供者对  $x=0.2$  的  $\text{HgCdTe}$  样品进行了 77 K 下反射率测量, 在  $20\mu\text{m}$  到  $50\mu\text{m}$  波长范围, 由于多次内反射, 测得的总反射率为  $R'=39\%$ , 样品厚度  $d=170\mu\text{m}$ , 吸收系数取  $30\text{cm}^{-1}$ 。考虑多次内反射后, 计算得厚样品反射率为  $R=0.34$ , 根据  $R=(n-1)^2/(n+1)^2$ , 算

得  $n=3.8$ 。根据本文经验式(6), 可以算得 77 K 下,  $x=0.2$  的样品,  $n_0=3.77$ , 基本相等。

式(6)也可以用来计算  $\text{CdTe}$  的长波折射率  $n_0$ 。Chelikowsky J. 和 Cohen M. L.<sup>[5]</sup> 进

表2 折射率随温度变化的实验值与计算值

$T(K)$	80	100	150	200	250	300
实验值 $n_{\lambda=20\mu m}$	3.68	3.66	3.61	3.55	3.51	3.48
计算值 $n_0$	3.69	3.65	3.52	3.41	3.32	3.24

行了CdTe的反射光谱的实验测量及理论计算,如图9所示。图中虚线是实验结果,实线是理论计算结果。实验曲线外推到零频率处,约有 $R=0.17$ ,算得 $n_0=2.40$ ;根据式(6),计算得77K下, $n_0=2.51$ 。另外,Freeouf<sup>[6]</sup>曾在0.15—8eV能量范围测量了CdTe的室温反射光谱,外推到零频率处, $R=0.21$ ,算得 $n_0=2.69$ ;根据式(6),计算得300K下, $n_0=2.55$ 。

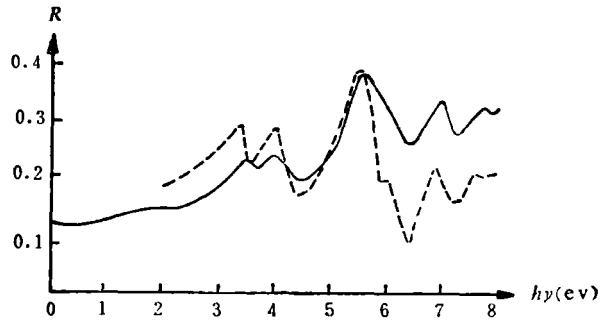


图9 CdTe的反射光谱(引自参考文献[5])

由此可见,式(6)可以用来大致估算 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 不同组份样品在不同温度下的长波折射率,对远红外光学性质研究可提供参考。

#### 四、讨 论

根据K-K关系式,长波折射率与吸收曲线所围面积直接相关,积分面积愈大,折射率也就愈高。吸收曲线所围面积与吸收边位置(即 $E_g$ )及吸收曲线转弯后的陡度有关。 $E_g$ 增加,吸收边向短波方向移动,会使积分面积减小;但同时吸收曲线转弯后的陡度也随之增加,又使积分面积增加,这是两个相反的贡献。从实验结果来看,使积分面积增加的贡献远小于使积分面积减小的贡献。图10表示不同组份 $x$ 的 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 样品在300K时的吸收光谱,可以看出,组份 $x$ 增加, $E_g$ 变大,亦即当吸收边向短波方向移动时,积分面积趋于减少,从而长波折射率降低。 $E_g$ 增加时, $n_0$ 减小的数量关系可由式(4)描述,至于 $E_g$ 与 $n_0$ 的更为本质的联系,仍有待进一步研究。

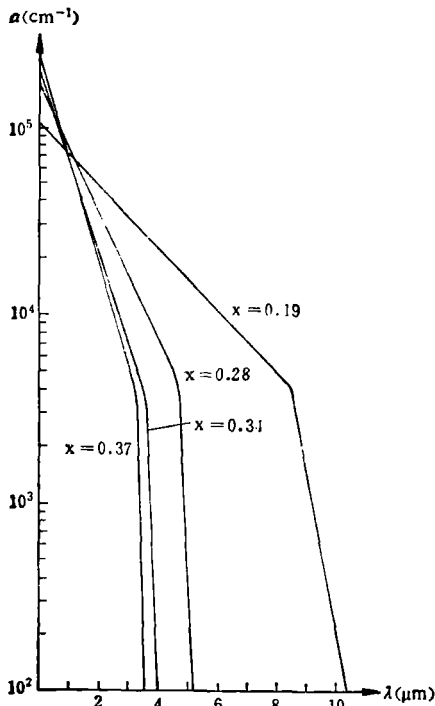


图10 积分面积随 $E_g$ 增加而减小

致谢——本工作是在导师汤定元教授和徐世秋老师指导下进行的,并由唐文国同志提供了 $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$ 样品的远红外反射光谱,作者深表感谢。

## 参 考 文 献

- [ 1 ] Moss T. S., *Semiconductor Opto-Electronics*, Butterworth, London, 1973, 34.
- [ 2 ] Moss T. S., *Photoconductivity in the Elements*, Butterworth, London, 1952, 61; *Optical Properties of Semiconductors*, Butterworth, London, 1959, 48.
- [ 3 ] 褚君浩, 徐世秋, 汤定元, *科学通报*, **27** (1982), 7: 403.
- [ 4 ] Finkman E. & Nemirovsky Y. J., *Appl. Phys.* **50** (1979), 6: 4356.
- [ 5 ] Chelikowsky J. & Cohen M. L., *Phys. Rev.* **B14** (1976), 556.
- [ 6 ] Freeouf J. L., *Phys. Rev.* **B7** (1973), 3810.

## THE LONG-WAVELENGTH REFRACTIVE INDEX FOR $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ BY MEANS OF K-K RELATION CALCULATIONS

CHU JUNHAO

(Shanghai Institute of Technical Physics, Academia Sinica)

### ABSTRACT

Based on the experimental intrinsic absorption spectra of  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ , the long-wavelength refractive index  $n_0$  is calculated for  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  with  $0.19 \leq x \leq 0.37$  and  $80 \leq T \leq 300$  from the K-K relation. It is found that Moss relation  $n_0^4 E_g = 55.5x + 7.8$  is valid for this material. By substituting the empirical formula of the bandgap  $E_g(x, T)$  into above expression, the following approximation for the long-wavelength refractive index  $n_0$  is obtained,  $n_0^4 = 55.5x + 7.8 / [(-0.295 + 1.87x - 0.28x^2) + (6.0 - 14x + 3.0x^2) \cdot 10^{-4}T + 0.35x^4]$ , which is used to calculate the values of index  $n_0$  of the samples with different composition  $x$  and at different temperature  $T$ . The calculation results agree with the experimental ones.